

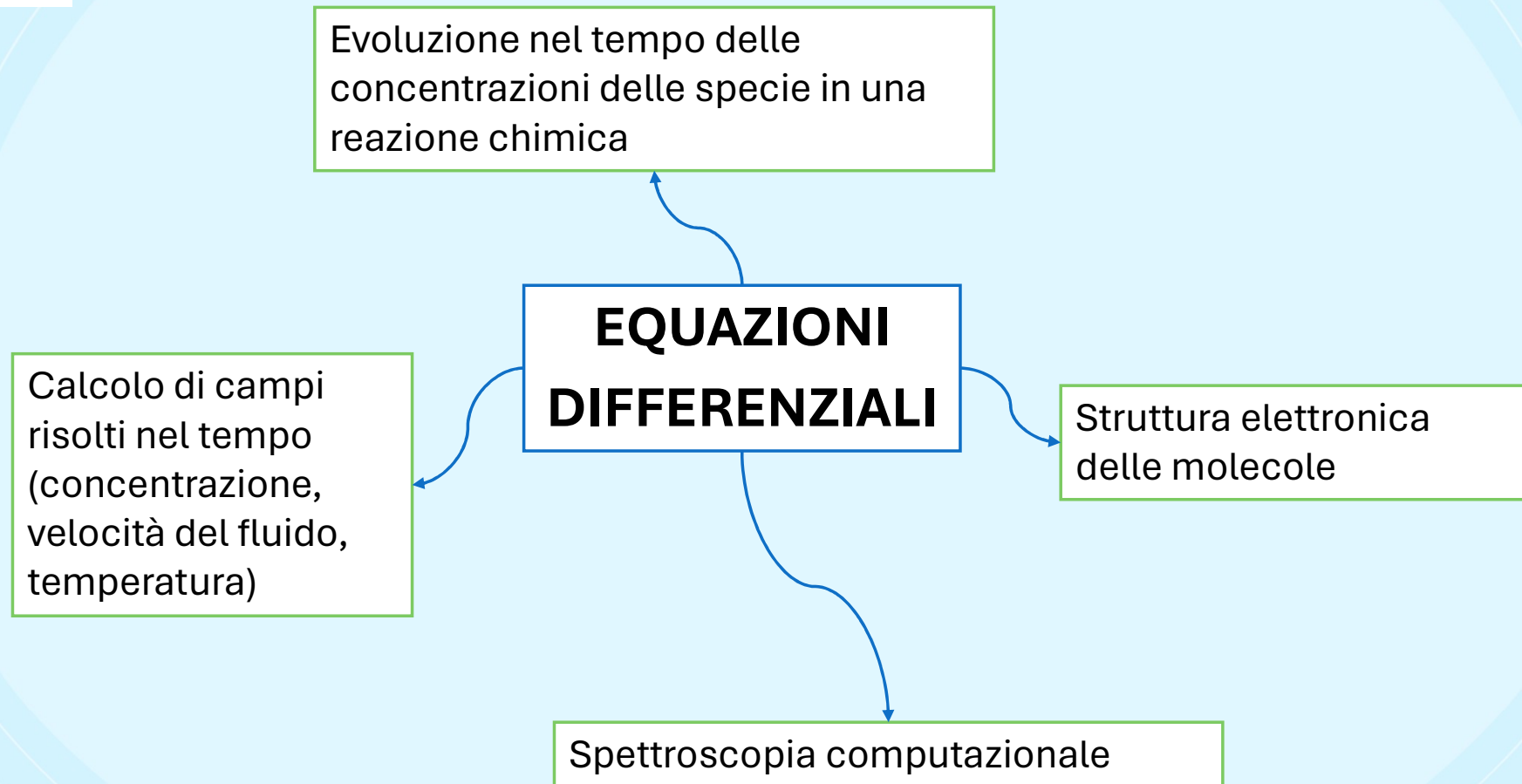
Equazioni Differenziali



Obiettivi di apprendimento

- ODE e PDE lineari
- Condizioni iniziali e condizioni al contorno
- Metodo alle differenze finite
- Utilizzo di `scipy.integrate.solve_ivp` per la soluzione numerica di ODE.
- Utilizzo della libreria `py-pde` per la soluzione numerica di PDE.

Esempi



Catalogazione

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_m, \frac{\partial^i y}{\partial x_j^i}\right) = f$$

Omogenee se $f = 0$
Non omogenee se $f \neq 0$

Ordinarie (ODE – *ordinary differential equations*):
funzioni di una sola variabile

Alle differenze parziali (PDE – *partial differential equations*):
funzioni di due o più variabili

Lineari:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{i,j}(\mathbf{x}) \frac{\partial^i y(\mathbf{x})}{\partial x_j^i}$$

Coefficienti costanti: $a_{i,j} = \text{cost}$

ODE lineari

Primo ordine: $\frac{dy(x)}{dx} = f(x)$

Può essere
analitico o
numerico

Soluzione: $y(x) = y(x_0) + \int_{x_0}^x du f(u)$

Condizione
iniziale

A variabili separabili: $M(x)dx + N(y)dy = 0$

Soluzione: $\int_{x_0}^x du M(u) = \int_{y_0}^y dv N(v)$

Esempi

Dipendenza dell'entalpia da T gas ideali

$$\frac{dH(T)}{dT} = c_p$$

Cinetica del primo ordine: $A \xrightarrow{k} \text{prodotti}$

$$\frac{1}{[A]} d[A] + k dt = 0$$

ODE lineari

Ordine n semplici: $\frac{d^n y(x)}{dx^n} = f(x)$

Sono necessarie n condizioni iniziali: sulla funzione e sulle derivate fino all'ordine $n - 1$

Soluzione:

$$y(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(x - x_0)^k}{k!} \left(\frac{\partial^k y}{\partial x^k} \right)_{|y=y_0} + \frac{1}{(n-1)!} \int_{x_0}^x du (x-u)^{n-1} f(u)$$

Lineari del primo ordine: $y'(x) + a(x)y(x) + b(x) = 0$

Soluzione: $y(x) = e^{-\int_{x_0}^x du a(u)} \left[y(x_0) + \int_{x_0}^x dv b(v) e^{\int_{x_0}^v du a(u)} \right]$

Esempi

Equazione di Newton

$$\frac{d^2 x(t)}{dx^2} = a(x)$$

Rilassamento longitudinale della magnetizzazione di spin in esperimenti NMR

$$\frac{dM_z(t)}{dt} + \frac{1}{T_1} M_z(t) - \frac{M_0}{T_1} = 0$$

ODE lineari

Lineari di ordine n : $y^{(n)} + a_1y^{(n-1)} + \dots + a_{n-1}y' + a_ny = f$

Soluzione:

cambio di variabili: $z_1 = y, z_2 = y',$ ecc. fino a $z_n = y^{(n-1)}$

Si può impostare il sistema lineare

$$\begin{cases} z_1' & = & z_2 \\ z_2' & = & z_3 \\ \dots & & \\ z_{n-1}' & = & z_n \\ z_n' & = & -a_1z_{n-1} - a_2z_{n-2} - \dots - a_nz_1 + f \end{cases}$$

Che può essere riscritto in forma matriciale

$$\frac{dz}{dx} = \mathbf{A}z + \mathbf{f}$$

che deve essere risolto soggetto alle condizioni iniziali

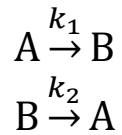
$$z_0 = z(\mathbf{x}_0).$$

Come si risolve?

ODE lineari

Caso semplice: sistema di equazioni lineari di **primo ordine** a **coefficienti costanti**

Esempio: dato il seguente meccanismo di reazione, calcolare l'evoluzione temporale delle specie chimiche data la condizione iniziale $[A]_0 = A_0$ e $[B]_0 = 0$:



Si può impostare il sistema lineare

$$\begin{cases} \frac{d[A]}{dt} = -k_1[A] + k_2[B] \\ \frac{d[B]}{dt} = k_1[A] - k_2[B] \end{cases}$$



Che può essere riscritto in forma matriciale

$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = \mathbf{M}\mathbf{c}$$
$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} [A] \\ [B] \end{bmatrix}, \mathbf{M} = \begin{bmatrix} -k_1 & k_2 \\ k_1 & -k_2 \end{bmatrix}$$

sotto la condizione iniziale $\mathbf{c}_0 = \begin{bmatrix} A_0 \\ 0 \end{bmatrix}$

ODE lineari

$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = \mathbf{M}\mathbf{c} \quad \text{sotto la condizione iniziale } \mathbf{c}_0 = \begin{bmatrix} A_0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Primo metodo: soluzione formale

$$\mathbf{c}(t) = e^{\mathbf{M}t} \mathbf{c}_0$$

Algoritmo:

1. Si costruisce la matrice \mathbf{M}
2. Si calcolano autovalori ($\mathbf{\Lambda}$) e autovettori destri (\mathbf{V}) di \mathbf{M} , t.c. $\mathbf{M}\mathbf{V} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}$
3. Si costruisce il vettore iniziale \mathbf{c}_0
4. Per il valore (o i valori) di t a cui si cerca la soluzione si calcola la matrice $e^{\mathbf{A}t}$ e quindi la soluzione $\mathbf{c}(t) = \mathbf{V}e^{\mathbf{\Lambda}t}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{c}_0$

In generale, \mathbf{A} non è Hermitiana,
per cui gli autovalori destri non
costituiscono una matrice unitaria

ODE lineari

$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = \mathbf{M}\mathbf{c} \quad \text{sotto la condizione iniziale } \mathbf{c}_0 = \begin{bmatrix} A_0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Secondo metodo: approssimazione alle differenze finite

Si costruisce una approssimazione numerica della derivata. Ad esempio, con lo schema di Eulero (semplice, ma può diventare poco stabile in molti problemi):

$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} \approx \frac{\mathbf{c}(t + \Delta t) - \mathbf{c}(t)}{\Delta t}$$

Per conoscere la soluzione ad un dato tempo t si sceglie l'incremento Δt e si imposta un ciclo che aggiorna la serie temporale di $\mathbf{c}(t)$ passo per passo, a salti temporali pari all'incremento. Algoritmo:

1. Dati t e Δt si determina il numero di passi da compiere $n = t/\Delta t$
2. Si costruisce il vettore iniziale \mathbf{c}_0
3. In un ciclo per k che va da 1 a n , si calcola: $\mathbf{c}_k = \mathbf{c}(k \Delta t) = \mathbf{c}_{k-1} + \Delta t \mathbf{M} \mathbf{c}_{k-1}$

Questo metodo risulta comodo nel caso di problemi a coefficienti non costanti, ossia $\mathbf{M} = \mathbf{M}(t)$

PDE lineari

Quando la funzione incognita è funzione di più variabili, essa viene definita tramite un'equazione differenziale alle derivate parziali, nella quale devono apparire (almeno al primo ordine) le derivate parziali rispetto a tutte le variabili.

Comunemente, in ambito chimico, le PDE vengono usate per definire funzioni del tempo e delle coordinate spaziali e, in una dimensione, assumono la forma generale:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \alpha(x) \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [\beta(x) u(x, t)] + \gamma(x, t)$$

Derivata prima
rispetto al tempo

Termine che tiene conto
dell'evoluzione che avviene
all'interno del sistema

Termine che tiene conto
del fatto che il sistema
sia aperto

Termine che tiene conto
di fattori «esterni» che
agiscono sul campo

Esempi 1D

Equazione di Schrödinger per una particella libera:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

PDE

Trasporto del calore:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\kappa}{\rho c_p} \frac{\partial T}{\partial x}$$

Diffusione libera:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial c}{\partial x}$$

Equazione di Navier-Stokes:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \nu \frac{\partial}{\partial x} u + \frac{\partial u^2}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{\rho_0} \right)$$

PDE lineari

Nelle tre dimensioni dello spazio:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{V}} \cdot \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{V}} u(\mathbf{r}, t) + \hat{\mathbf{V}} \cdot [\boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}, t)] + \gamma(\mathbf{r}, t)$$

$$\text{Gradiente: } \hat{\mathbf{V}} f(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \partial f / \partial x \\ \partial f / \partial y \\ \partial f / \partial z \end{bmatrix}$$

$$\text{Divergenza: } \hat{\mathbf{V}} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{r}) = \frac{\partial a_x(\mathbf{r})}{\partial x} + \frac{\partial a_y(\mathbf{r})}{\partial y} + \frac{\partial a_z(\mathbf{r})}{\partial z}$$

In base alle proprietà della matrice $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r})$, queste PDE si chiamano:

- **Ellittiche**, se gli autovalori di $\boldsymbol{\alpha}$ sono tutti positivi, o tutti negativi
- **Paraboliche**, se gli autovalori di $\boldsymbol{\alpha}$ sono tutti positivi, o tutti negativi, tranne uno che deve essere nullo
- **Iperboliche**, se tutti gli autovalori di $\boldsymbol{\alpha}$ sono positivi tranne uno che è negativo, o viceversa
- **Ultraiperboliche**, in tutti gli altri casi

Condizioni al contorno: per definire completamente la dipendenza spaziale della funzione incognita, occorre specificare le condizioni al contorno, ossia come la funzione si comporta sulla frontiera (\mathcal{F}) del dominio.

Dirichlet

$$u(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \mathcal{F}} = \bar{u}(\mathbf{r}, t)$$

Neumann

$$\frac{\partial u(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{n}}|_{\mathbf{r} \in \mathcal{F}} = \bar{u}(\mathbf{r}, t)$$

**Condizioni al
contorno**

Miste

$$\left[a(\mathbf{r})u(\mathbf{r}, t) + b(\mathbf{r})\frac{\partial u(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{n}} \right]_{\mathbf{r} \in \mathcal{F}} = \bar{u}(\mathbf{r}, t)$$

Cauchy

$$u(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \mathcal{F}} = \bar{u}_0(\mathbf{r}, t)$$
$$\frac{\partial u(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{n}}|_{\mathbf{r} \in \mathcal{F}} = \bar{u}_1(\mathbf{r}, t)$$

Metodo di soluzione alle differenze finite

ODE lineari: si discretizza la derivata temporale e si propaga in funzione della condizione iniziale.

$$\frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}(t)) \quad \text{Condizione iniziale: } \mathbf{u}_0 = \mathbf{u}(t_0)$$

Propagazione con lo schema di discretizzazione scelto.

Ad es., Eulero: $\mathbf{u}_n = \mathbf{u}(n\Delta t) = \mathbf{u}_{n-1} + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{u}_{n-1})$

PDE lineari: si discretizzano la derivata temporale e quella spaziale, e si propaga in funzione della condizione iniziale per quanto riguarda il tempo, e le condizioni al contorno per quanto riguarda lo spazio.

$$\frac{d\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{dt} = \mathbf{A}(\mathbf{u}, \mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad \text{Condizione iniziale: } \mathbf{u}_0(\mathbf{r}) = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t_0)$$

Condizioni al contorno: dipendono dal problema

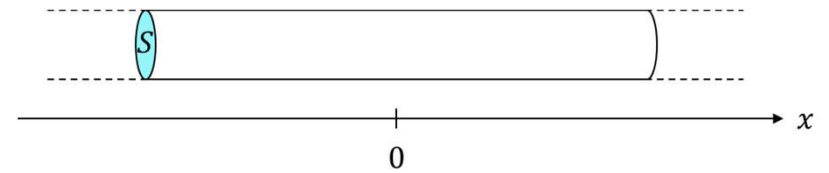
Si rappresenta la condizione iniziale su una griglia di punti nello spazio. $\mathbf{A}(\mathbf{u}, \mathbf{r}, t)$ è la rappresentazione alle differenze finite dell'operatore di evoluzione temporale del campo u sulla griglia. La serie temporale si ottiene discretizzando la derivata temporale.

Esempio: Equazione di diffusione in una dimensione

Si consideri un fluido confinato in un cilindro con raggio di base molto minore rispetto alla lunghezza, in modo da considerare il sistema monodimensionale. Sia x la coordinata che individua una sezione di tubo lungo l'asse. Inoltre, si può assumere che il cilindro sia infinitamente lungo.

Al tempo $t_0 = 0$, nel punto $x_0 = 0$ viene iniettato un soluto. In tale istante, la concentrazione del soluto sia descritta dall'espressione:

$$c(x, 0) = c_0 \delta(x - 0)$$



Per diffusione libera, il campo di concentrazione evolve secondo la seconda legge di Fick:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2}$$

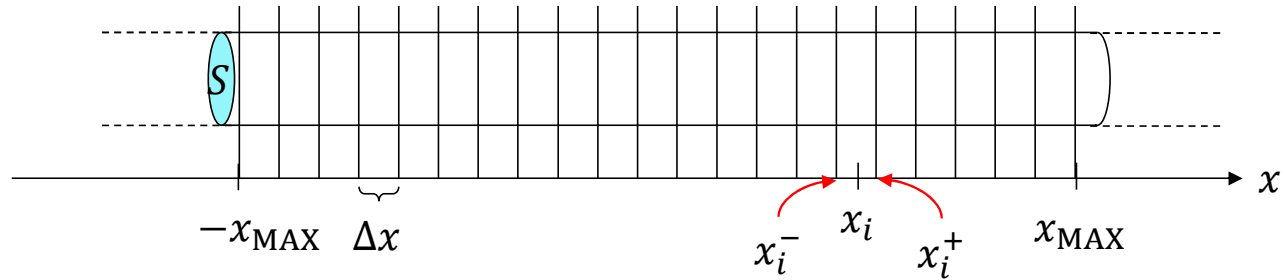
Si applichino le condizioni al contorno di Neumann:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=\pm\infty} = 0$$

Condizione di flusso nullo ai bordi: ossia conservazione della materia.

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x}$$

Esempio: Equazione di diffusione in una dimensione



Viene scelto un valore x_{MAX} che ‘rappresenti’ l’infinito.

Il dominio viene diviso in N intervalli di lunghezza $\Delta x = 2x_{MAX}/N$.

Sia $x_i = -x_{MAX} + \left(i - \frac{1}{2}\right) \Delta x$ per $i = 1, 2, \dots, N$ il centro dell’ i -esimo intervallo e $x_i^\pm = x_i \pm \Delta x/2$.

Inoltre, $x_1^- = -x_{MAX}$ e $x_N^+ = x_{MAX}$.

Si cerca la soluzione dell’ equazione differenziale negli N centri degli intervalli, ossia si cercano i valori per $c_i(t) = c(x_i, t)$.

Esempio: Equazione di diffusione in una dimensione

Il flusso in x_i sia approssimato con la formula centrale per le derivate numeriche:

$$J(x_i, t) = -D \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=x_i} = -D \frac{c\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, t\right) - c\left(x_i - \frac{\Delta x}{2}, t\right)}{\Delta x} = -D \frac{c(x_i^+, t) - c(x_i^-, t)}{\Delta x}$$

Ricordando che $J_j(x_1^-, t) = J_j(x_N^+, t) = 0$, si ottengono le condizioni al contorno sulla concentrazione:

$$c(x_0, t) = c(x_1, t) \text{ e } c(x_N, t) = c(x_{N+1}, t)$$

In secondo luogo, il gradiente del flusso è

$$\frac{\partial J(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=x_i} = \frac{J(x_i^+, t) - J(x_i^-, t)}{\Delta x}$$

ricordando che $J(x_1^-, t) = J(x_N^+, t) = 0$.

Di conseguenza, la parte a destra dell'equazione di Fick può essere approssimata con

$$D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_i} \approx D \frac{c(x_{i+1}, t) - 2c(x_i, t) + c(x_{i-1}, t)}{\Delta x^2}$$

Esempio: Equazione di diffusione in una dimensione

La versione discretizzata dell'equazione differenziale è quindi data dal sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} c_1(t) &= \frac{D}{\Delta x^2} c_2(t) - \frac{D}{\Delta x^2} c_1(t) \\ \vdots & \\ \frac{\partial}{\partial t} c_i(t) &= \frac{D}{\Delta x^2} c_{i+1}(t) - 2 \frac{D}{\Delta x^2} c_i(t) + \frac{D}{\Delta x^2} c_{i-1}(t) \\ \vdots & \\ \frac{\partial}{\partial t} c_N(t) &= -\frac{D}{\Delta x^2} c_N(t) + \frac{D}{\Delta x^2} c_{N-1}(t) \end{cases}$$

Sia $\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}$, il set di equazioni differenziali può essere riscritto in forma matriciale:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{c}(t) = \mathbf{A} \mathbf{c}(t)$$

Esempio: Equazione di diffusione in una dimensione

La matrice \mathbf{A} ha dimensioni $N \times N$ e una struttura di questo tipo, con elementi

$$A_{m,n} = \begin{cases} -\frac{D}{\Delta x^2} (2 - \delta_{m,1} - \delta_{m,N}) & m = n \\ \frac{D}{\Delta x^2} & |m - n| = 1 \\ 0 & |m - n| > 1 \end{cases}$$

Si tratta di una matrice **tridiagonale**, con elementi che possono essere diversi da zero solo sulla diagonale, sulla prima sopra diagonale e sulla prima sotto diagonale.

Il numero di possibili elementi diversi da zero è quindi $3N - 2$. Il rapporto $(3N - 2)/N^2$ tende a zero per N che tende a infinito. Già per $N = 100$, gli elementi non nulli sono il 10% del totale. Si tratta di una matrice sparsa.

Esempio: Equazione di diffusione in una dimensione

Usando lo schema di Eulero per discretizzare l'asse temporale:

$$\mathbf{c}(t + \Delta t) = \mathbf{c}(t) + \Delta t \mathbf{A} \mathbf{c}(t)$$

Con condizione iniziale:

$$c_i(0) = \delta_{i,N/2}$$

Team work

Implementare la soluzione dell'equazione di diffusione libera in una dimensione sotto queste condizioni:

1. Impostare $x_{MAX} = 1$ e $N = 100$, da cui $\Delta x = 0.02$
2. La condizione iniziale sia $c_0 = 1$ per $x = x_{N/2}$, 0 altrimenti
3. Impostare $D = 1$
4. Il valore di Δt va scelto in modo che l'algoritmo di Eulero sia stabile. Questo si ottiene per $\Delta t < \Delta x^2 / 2D$
5. Propagare la risoluzione con lo schema di Eulero per 1000 step temporali.

Salvare la soluzione in una matrice \mathbf{c} tale per cui ogni colonna corrisponda al profilo di concentrazione nello spazio ad un dato tempo. Quindi, la prima colonna ($c[:, 0]$) sarà la condizione iniziale, la seconda colonna ($c[:, 1]$) il profilo di concentrazione al tempo $t = \Delta t$ e così via.

Rappresentare in un unico grafico la soluzione a diversi tempi. In alternativa, fare un grafico interattivo in cui usando una barra scorrevole si può modificare il tempo al quale rappresentare la soluzione.

Python time

Il modulo `integrate` di `scipy` ha il metodo `solve_ivp` per risolvere sistemi di ODE lineari del primo ordine.

```
s = solve_ivp(f, [ti, tf], c0, args = ...)
```

Assegna alla variabile `s` la soluzione del sistema data una funzione `f`, che implementa il calcolo delle equazioni, i tempi iniziale (`ti`) e finale (`tf`), la condizione iniziale `c0` ed eventuali argomenti aggiuntivi alla funzione.

La libreria `py-pde` permette di risolvere equazioni differenziali alle differenze parziali fornendo una buona libertà di definizione di equazione e dominio.